

## Resum

La Química Teòrica i Computacional ha anat adquirint amb el pas del temps més importància en l'àmbit de la ciència. S'ha manifestat com una eina molt útil per a la predicció de propietats químiques i l'establiment de possibles mecanismes de reacció entre d'altres utilitats. L'evolució de la informàtica sumada als nous mètodes de càlcul, en especial la teoria del funcional de la densitat (DFT), ha significat una autèntica revolució en la capacitat de donar resposta als problemes químics.

Aquesta tesi s'ha realitzat en col·laboració amb grups experimentals. Malgrat que també es presenten estudis pròpiament metodològics sobre la capacitat dels funcionals de la densitat per determinar barreres de reacció i calcular desplaçaments químics, la investigació que es presenta té l'objectiu de complementar i entendre les reaccions i síntesis realitzades experimentalment. D'aquesta manera, s'explica la varietat de casos estudiats.

Tanmateix, s'ha intentat acotar el contingut de la tesi als compostos més àmpliament estudiats que són compostos on el fòsfor, formant enllaços P-C, té una presència important (formilfosfans i derivats, oxirans fosforats, fosfino(silil)carbans, etc.). Per tant, el fil i el títol que porta aquesta tesi fan referència a l'*Estudi teòric de l'estructura i la reactivitat de compostos orgànics fosforats*.

## Abstract

Computational and Theoretical Chemistry is increasing its relevance in science in the last years. It is a useful tool to predict chemical properties and to determine possible reaction mechanisms, among other utilities. The computers evolution and the new calculation methods, specially the Density Functional Theory (DFT), explain the real revolution in the capacity of giving answers to chemical questions.

This thesis has been done in collaboration with experimental Chemistry groups. Although we have also carried out methodological studies about the DFT functionals capacity to determine energy barriers and chemical shifts, the investigation summarized in this document has been done with the aim to complement and understand real experimental reactions. Thus, this would explain the wide range of studied and explained topics.

However, the thesis content has been limited to phosphorated compounds with P-C bonds such as formilphosphanes, phosphorated oxiranes, phosphino(silyl)carbenes, etc. Thus, the thread and the title of this document are related to the *Theoretical Study of Structure and Reactivity of Phosphorated Organic Compounds*.